Index

Commentationes et Relationes

Alagona, G., Tomasi, J.: Contracted and Uncontracted Oscillator Orbitals in CI Calculations on Two Electron Systems 42
Allen, L. C.: The Shape of Molecules 117
Armstrong, D. R., Clark, D. T.: The Electronic Structures and Energies of Borazine, Boronimide and Dimeric Boronimide 307
Ballhausen, C. J.: The Crystal Field Splittings in the 5 *f* Complexes 234
Berke, T. D., s. Dannenberg, J. J. 99
Blinder, S. M.: Spectral Variational Principle for Green's Functions. 382
Bonaccorsi, R., Pullman, A., Scrocco, E., Tomasi, J.: The Molecular Electrostatic Potentials for the Nucleic Acid Bases: Adenine, Thymine, and Cytosine 51
Brett, A. C., Dingle, T. W.: Excited State Wave Functions. I. Comparison of the Messmer and Rayleigh-Ritz Variational Methods in the Case of Hydrogen 111
Buemi, G., s. Favini, G. 61
Buenker, R. J., Peyerimhoff, S. D.: Extension of Walsh's Rules to More General Systems 132
Clark, D. T., s. Armstrong, D. R. 307
Coubeils, J. L., Pullman, B.: Molecular Orbital Study of the Conformational Properties of Phenothiazines 35
Dannenberg, J. J., Berke, T. D.: Hyperconjugation in the 2-Butyl Cation 99
DeArmond, M. K., s. Hauser, P. J., et al. 78
Dingle, T. W., s. Brett, A. C. 111
Favini, G., Buemi, G.: Configuration Analysis and Electronic States Properties. I. Four- and Six-π-Electron Systems 61
Fischer, J., Veillard, A., Weiss, R.: Nature de la liaison dans l'ion tétraperoxochromate CrO_8^{3-}: une étude des structures cristalline et électronique 317
Fraga, S., s. Lo, B. W. N., et al. 71
— s. Lo, B. W. N., et al. 300
Goodisman, J.: Energy Levels in Modified Quantum Statistical Potentials. 1
Gouterman, M., s. McHugh, A. J., et al. 346
Gunter, J. D., s. Hauser, P. J., et al. 78
Halton, M. P.: SCC—EH—MO Calculations on the Bonding and Electric Field Gradient in Oxyhaemoglobin and Other Haem Derivatives 89
Hansen †, K. H., Koglin, E.: Polarisierte Kristallspektren einiger Hexaharnstoffkomplexe bei tiefen Temperaturen. Teil II. Luminiszenz 216
— Schenk, H. J.: Polarisierte Kristallspektren einiger Hexaharnstoffkomplexe bei tiefen Temperaturen. Teil I. Absorption 207
Hartmann, H.: Die Bewegung eines Körpers in einem ringförmigen Potentialfeld 201
Hauser, P. J., Schreiner, A. F., Gunter, J. D., Mitchell, W. J., DeArmond, M. K.: Electronic Structures and MCD Spectra of Trigonal CR(III)S_6 Systems 78
Helfrich, K.: Constants of Motion for Separable One-Particle Problems with Cylinder Symmetry 271
Hensel, V., s. Kohlmaier, G. H., et al. 251
Johansen, H., s. Ranck, J. P. 334
Jørgensen, C. K.: Chemical Effects of Inner Shells Studied by Photo-Electron Spectrometry 241
Jug, K., Labhart, H.: Über den Kontinuumseinfluß auf die Polarisierbarkeit von Molekülzuständen 283
— Parr, R. G.: On the Rules of Scheibe 147
Jungen, M., s. Staemmler, V. 152
Kikuchi, O., s. Morikawa, T., et al. 393
Koglin, E., s. Hansen †, K. H. 216
Kohlmaier, G. H., Siré, E. O., Hensel, V.: Eine exakte klassische Behandlung der Schwingungs-Translations-Energieübertragung bei symmetrischen Zentralstößen 251

Labhart, H., s. Jug, K. . . . 283
Lischka, H., s. Russegger, P., et al. . . . 191
Lo, B. W. N., Saxena, K. M. S., Fraga, S.: Electron Spin-Spin Contact Interaction in Many-Electron Atoms . . . 71
— — — Mass-Variation and Darwin Relativistic Corrections in Many-Electron Atoms 300
McAloon, B. J., Perkins, P. G.: An SCF Study of P_4O_6 and P_4O_{10} . . . 102
McHugh, A. J., Gouterman, M., Weiss, C., Jr.: Porphyrins XXIV. Energy, Oscillator Strength, and Zeeman Splitting Calculations (SCMO-CI) for Phthalocyanine, Porphyrins, and Related Ring Systems . . . 346
Mechtler, R., s. Neckel, A., et al. . . . 170
Mitchell, W. J., s. Hauser, P. J., et al. . . . 78
Morikawa, T., Kikuchi, O., Someno, K.: SCF MO INDO Calculation of Anisotropic Hyperfine Coupling Tensors for σ-Type Radicals . . . 393
Neckel, A., Rastl, P., Weinberger, P., Mechtler, R.: Berechnung der Bandstruktur vom Vanadiumcarbid VC . . . 170
Parr, R. G., s. Jug, K. . . . 147
Peat, F. D.: Suggested Calculations Using Transition Density Matrices . . . 11
Perkins, P. G., s. McAloon, B. J. . . . 102
Peters, D.: The Use of Symmetry in the Self-Consistent Field Theory of the Localised Molecular Orbital . . . 16
Peyerimhoff, S. D., s. Buenker, R. J. . . . 132
Polák, R., Rosmus, P.: Freie Elektronenpaare in lokalisierten CNDO/2-Wellenfunktionen der Stickstoffverbindungen . . . 107
Porter, G. B.: Reversible Energy Transfer . . . 265
Pullman, A., s. Bonaccorsi, R., et al. . . . 51
Pullman B., s. Coubeils, J. L. . . . 35
Raeber, P.: Zur Quantenchemie zyklischer und linearer Kohlenwasserstoffe . . . 371
Ranck, J. P., Johansen, H.: Polarization Functions and Geometry Optimization in *ab initio* Calculations of the Rotational Barrier in Hydrogen Peroxide . . . 334
Rastl, P., s. Neckel, A., et al. . . . 170
Reinsch, E.-A.: Das Kastenmodell als Grundlage für ein *ab initio* Verfahren. II. Berechnung der Integrale . . . 290
Rosmus, P., s. Polák, R. . . . 107
Russegger, P., Lischka, H., Schuster, P.: Modellrechnungen zur Solvation einatomiger Ionen (LCAO—MO-Untersuchungen von Molekülstrukturen VIII) . . . 191
Saxena, K. M. S., s. Lo, B. W. N., et al. . . . 71
— s. Lo, B. W. N., et al. . . . 300
Schenk, H. J., Schwarz, W. H. E.: Spin-Bahn-Wechselwirkung und Jahn-Teller-Effekt. Analyse der $^4A_2 \rightarrow {}^2E$-Schwingungsprogression bei $CrHa_6 J_3$ . . . 225
— s. Hansen †, K. H. . . . 207
Schreiner, A. F., s. Hauser, P. J., et al. . . . 78
Schuster, P., s. Russegger, P., et al. . . . 191
Schwarz, W. H. E.: Gombás Pseudopotential SCF Calculations for Atoms . . . 29
— s. Schenk, H. J. . . . 225
Scrocco, E., s. Bonaccorsi, R., et al. . . . 51
Shchembelov, G. A., Ustynyuk, Yu. A.: CNDO/2 Calculation of Prototropic Rearrangement in Cyclopentadiene . . . 389
Siré, E. O., s. Kohlmaier, G. H., et al. . . . 251
Someno, K., s. Morikawa, T., et al. . . . 393
Staemmler, V., Jungen, M.: The Direct Determination of Brueckner Orbitals with Application to the H_2 Molecule . . . 152
Tomasi, J., s. Alagona, G. . . . 42
— s. Bonaccorsi, R., et al. . . . 51
Ustynyuk, Yu. A., s. Shchembelov, G. A. . . . 389
Veillard, A., s. Fischer, J., et al. . . . 317
Weinberger, P., s. Neckel, A., et al. . . . 170
Weiss, C., Jr., s. McHugh, A. J., et al. . . . 346
Weiss, R., s. Fischer, J., et al. . . . 317

Theoretica Chimica Acta

It is a fundamental condition that manuscripts submitted should not have been published elsewhere, in this or any other country. The author must undertake not to publish elsewhere at a later date. With the acceptance of a manuscript for publication, the publishers acquire the sole copyright for all languages and countries. Unless special permission has been granted by the publishers, no photographic reproductions, microform or any other reproductions of a similar nature may be made of the journal, of individual contributions contained therein or of extracts therefrom.

The use in this journal of registered or trade names, trademarks etc. without special acknowledgement does not imply that such names, as defined, by the relevant protection laws, may be regarded as unprotected and thus free for general use.

Grundsätzlich dürfen nur Arbeiten eingereicht werden, die vorher weder im Inland noch im Ausland veröffentlicht worden sind. Der Autor verpflichtet sich, seinen Beitrag auch nachträglich nicht an anderer Stelle zu publizieren. Mit der Annahme des Manuskriptes und seiner Veröffentlichung durch den Verlag geht das Verlagsrecht für alle Sprachen und Länder einschließlich des Rechts der fotomechanischen Wiedergabe oder einer sonstigen Vervielfältigung, auch in Mikroform, an den Verlag über. Jedoch wird gewerblichen Unternehmen für den innerbetrieblichen Gebrauch nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie abgeschlossenen Rahmenabkommens die Anfertigung einer fotomechanischen Vervielfältigung gestattet. Wenn für diese Zeitschrift kein Pauschalabkommen mit dem Verlag vereinbart worden ist, ist eine Wertmarke im Betrage von DM 0,40 pro Seite zu verwenden. *Der Verlag läßt diese Beträge den Autorenverbänden zufließen.*

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen usw. in dieser Zeitschrift berechtigt auch ohne besondere Kennzeichnung nicht zu der Annahme, daß solche Namen im Sinne der Warenzeichen- und Markenschutz-Gesetzgebung als frei zu betrachten wären und daher von jedermann benutzt werden dürften.

En principe, ne sont acceptés que des articles n'ayant jamais été publiés, ni dans leur pays d'origine, ni à l'étranger. L'auteur s'engage à ne pas remettre son manuscrit ailleurs après acceptation. Dès l'acceptation d'un manuscrit et sa publication par la maison d'édition, le droit d'impression pour toutes langues et tous pays, y compris le droit de reproduction photographique, en microforme ou par tout autre moyen, est acquis par la maison d'édition.

L'utilisation de marques déposées, marques de commerce, etc., dans ce journal, même sans indications particulière, n'implique pas que l'emploi de ces dénominations est exonéré des restrictions qu'imposent les lois régissant l'utilisation des marques déposées, etc.

THEORETICA CHIMICA ACTA

Vol. 24 Fasc. 4

Commentationes

Jug, K., Labhart, H.: Über den Kontinuumseinfluß auf die Polarisierbarkeit von Molekülzuständen 283

On the Influence of the Continuum on the Polarizibility of States of Molecules

Reinsch, E.-A.: Das Kastenmodell als Grundlage für ein *ab initio* Verfahren. II. Berechnung der Integrale 290

The Box Model as a Basis for an ab initio Procedure. II. Evaluation of the Integrals

Lo, B. W. N., Saxena, K. M. S., Fraga, S.: Mass-Variation and Darwin Relativistic Corrections in Many-Electron Atoms 300

Armstrong, D. R., Clark, D. T.: The Electronic Structures and Energies of Borazine, Boronimide and Dimeric Boronimide 307

Fischer, J., Veillard, A., Weiss, R.: Nature de la liaison dans l'ion tétraperoxochromate CrO_8^{3-}: une étude des structures cristalline et électronique 317

Nature of Bonding in the Chrome V Tetraperoxo Ion CrO_8^{3-}: *A Study of Crystal and Electronic Structure*

Ranck, J. P., Johansen, H.: Polarization Functions and Geometry Optimization in *ab initio* Calculations of the Rotational Barrier in Hydrogen Peroxide 334

McHugh, A. J., Gouterman, M., Weiss, C., Jr.: Porphyrins XXIV. Energy, Oscillator Strength, and Zeeman Splitting Calculations (SCMO-CI) for Phthalocyanine, Porphyrins, and Related Ring Systems 346

Raeber, P.: Zur Quantenchemie zyklischer und linearer Kohlenwasserstoffe 371

Quantum Chemistry of Cyclic and Linear Hydrocarbons

Relationes

Blinder, S. M.: Spectral Variational Principle for Green's Functions 382

Shchembelov, G. A., Ustynyuk, Yu. A.: CNDO/2 Calculation of Prototropic Rearrangement in Cyclopentadiene 389

Morikawa, T., Kikuchi, O., Someno, K.: SCF MO INDO Calculation of Anisotropic Hyperfine Coupling Tensors for σ-Type Radicals 393

Indexed in Current Contents

Responsible for advertisements: Edgar Seidler, D-1000 Berlin 15, Kurfürstendamm 237
Telephone (0311) 883 37 55, Telex: 01-82 811

Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York

Printed in Germany by Brühlsche Universitätsdruckerei, Gießen

© by Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1972